統計熱力学的界面モデルを用いた
せん断流中における液滴挙動の数値シミュレーション*高田 尚樹^{*1}, 富山 明男^{*2}Numerical Simulation of Motion of Drops in a Shear Flow
Using a Statistical-Thermodynamic Interface ModelNaoki TAKADA^{*3} and Akio TOMIYAMA^{*3} National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST);
16-1 Onogawa, Tsukuba-shi, Ibaraki, 305-8569 Japan

For simulating immiscible two-phase flow and easily adjusting surface tension and thickness of diffused interface to desired values, a lattice-Boltzmann model based on the van-der-Waals-Cahn-Hilliard theory is improved by (a) introducing two parameters in a surface free energy and (b) adopting a particle number density function at a local equilibrium state for the convection term of the lattice Boltzmann equation. From the simulations of neutrally-buoyant drops in simple shear flows, it is confirmed that (1) the improved model can give good predictions for deformation and breakup of single drops, (2) the critical Reynolds number at which drop breakup takes place depends not only on the capillary number and the drop number density but also on the initial spatial arrangement of drops, (3) the pressure at the throat section of dumbbell-like drop immediately before breakup is higher than that at the edge of ellipsoidal-shaped drop.

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Multi-phase Flow, Numerical Analysis, Shear Flow, Fluid Dynamics, Drop, Lattice Boltzmann Method, Free Energy Theory, Phase-Field Modeling

1. 緒 言

閉鎖性の高い海洋やダム貯水池の深層部では、ヘドロが堆積する貧酸素水域が動植物の生育に悪影響を及ぼし栄養塩や金属イオンの蓄積により水質が悪化する。そのような環境問題を解決するために微細な気泡を用いた水質改善技術が既に開発されている^{①②③}が、微細気泡生成には流体中のせん断応力が重要な役割を果たしていると考えられる。著者らは、環境改善技術において重要な二相流体の微細化現象の検討を目的として、一様せん断流中における二相流体の変形及び分裂挙動に関する数値流体解析による研究を行っている。本論文では、基礎的な数値解析として行った、密度比・粘性比ともに1の二相流体中における液滴の変形・分裂のシミュレーション結果を報告する。

本研究では、格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM) ^{④⑤}の中で、統計熱力学の理論に従って二相流体界面を再現する Binary Fluid Model (LB-BFM) ^⑥を使用した。LBMでは、Phase-Field Model (PFM) ^{⑦⑧}と同様、流体の密度及び粘性等の物性は有限な厚さの

界面内部で急激かつ連続的に変化する。二相界面形状は系の自由エネルギーが最小になるように自律的に決定されるため、形状に関する境界条件は不要である。LB-BFM および PFM における界面構成の特徴は、Volume of Fluid (VOF) 法^⑨等の従来の界面追跡法^{⑩⑪}と異なり、(1) 表面張力を界面エネルギーの定義に従って与えられる、(2) 界面移流計算では、非平衡系の瞬時局所的な化学ポテンシャルの釣り合いを考慮して界面再構成を行う点にある。このため、複雑な幾何計算^⑫をせずに表面張力の影響が自動的に圧力場に反映されるとともに、Donor-Acceptor^⑬, FLAIR^⑭, MARS^⑮, CIP^⑯等のアルゴリズムを必ずしも用いなくとも、界面の輸送と再構成を実現できる。以上より、PFM と同じ界面の概念を有する LB-BFM は、相変化や溶解による界面の移動を自然に再現できる^⑯。また、合体や分裂等の大変形を繰り返す液滴や気泡群の多数の界面を容易に追跡する能力を持つと考えられる。

2. 二相流体界面のモデル化

2.1 自由エネルギー理論 本節では、本研究における界面のモデル化を説明する。LBM の Binary Fluid Model (LB-BFM) ^{⑥⑭}は、同じ質量を有する A・B 二成分の粒子で構成される二相系を想定し、各相を成分 A

* 原稿受付 2004 年 2 月 13 日。

^{*1} 正員、産業技術総合研究所(〒305-8569 つくば市小野川16-1)。^{*2} 正員、神戸大学大学院自然科学研究科(〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1)。

E-mail: naoki-takada@aist.go.jp

または B の粒子密度が相対的に高い領域として識別する。この二相の共存は、Phase-Field Model (PFM)⁽⁸⁾⁽⁹⁾と同様、van-der-Waals-Cahn-Hilliard 理論⁽⁶⁾に基づき、自由エネルギー Ψ を用いて統計熱力学的に再現される。LB-BFM の Ψ は、次のような最も簡単でよく知られた形式を持つ。

$$\Psi = \int dx \left\{ \psi(n, \Delta n, T) + \frac{\kappa}{2} |\nabla \Delta n|^2 \right\} \quad (1)$$

ここで、 $n, \Delta n$ は成分 A, B の粒子密度の和 $n_A + n_B$ と差 $n_A - n_B$ であり、 T は系の温度である。右辺第 1 項は、単位体積あたりの流体の自由エネルギーを表し、一般には Δn に関して double-well (下に凸な 2 個の極値を持つ) な関数で記述される。LB-BFM の関数 ψ には臨界温度 T_c を用いた次式を使用する。

$$\psi = \frac{T_c}{2} n \left(1 - \frac{\Delta n^2}{n^2} \right) - nT + T \left[\frac{n + \Delta n}{2} \ln \left(\frac{n + \Delta n}{2} \right) + \frac{n - \Delta n}{2} \ln \left(\frac{n - \Delta n}{2} \right) \right] \quad (2)$$

一方、式(1)の右辺第 2 項は界面における粒子密度勾配に派生するエネルギー寄与分に相当し、その比例定数 κ は表面張力と界面厚さに関係する。A-B 二成分混合流体は、 $T < T_c$ において Ψ を最小にするような粒子密度を持つ二相に自動的に分離する。

圧力テンソル $P_{\alpha\beta}$ 及び化学ポテンシャル $\Delta\mu$ は式(1)、(2)から以下のように導出される。

$$P_{\alpha\beta} = P\delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \Delta n}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \Delta n}{\partial x_\beta} \quad (3)$$

$$P = \Delta n \frac{\partial \Psi}{\partial \Delta n} + n \frac{\partial \Psi}{\partial n} - \Psi = nT - \kappa \Delta n \nabla^2 \Delta n - \kappa \frac{|\nabla \Delta n|^2}{2} \quad (4)$$

$$\Delta\mu = \frac{\partial \Psi}{\partial \Delta n} = -T_c \frac{\Delta n}{n} + \frac{T}{2} \ln \left(\frac{n + \Delta n}{n - \Delta n} \right) - \kappa \nabla^2 \Delta n \quad (5)$$

下付添字のギリシャ文字はデカルト座標系の指標を示す。本研究では、表面張力と界面厚さをより柔軟に決めることができるように、式(3)と(5)に共通の係数 κ を各々独立な κ_1 および κ_2 とした⁽⁷⁾⁽⁸⁾。

2.2 表面張力の定義と計算手順 平坦な静止界面に対する Bakker の式⁽⁹⁾に式(3)を代入すると、単位面積当たりの界面自由エネルギーとして表面張力 σ を次式で定義できる。

$$\sigma \equiv \kappa_1 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Delta n}{\partial x} \right)^2 dx \quad (6)$$

ここで、 x 軸を界面に垂直な方向に取っている。 σ を式(6)から求めるには、 Δn の x 方向分布を知る必

要がある。 $\Delta n(x)$ の値は界面内において数格子点に渡ってある正の値 Δn_0 と負の値 $-\Delta n_0$ の間で連続的に変化する。界面内密度分布 $\Delta n(x)$ は T, T_c, κ_2 の値によって変化する、化学ポテンシャルの平衡条件、

$$\Delta\mu = \text{constant} \quad (7)$$

を基に解析的に求められる。なお、臨界温度 T_c は、温度 T で均一な密度 n_0 及び Δn_0 の系の場合、次式から求められる。

$$\Delta\mu(n_0, \Delta n_0, T) = 0 \quad \text{for } \nabla(\Delta n) = 0 \quad (8)$$

本研究では、数値シミュレーションにおいて所定の表面張力 σ の値を実現するための前処理計算を以下の手順で実施する⁽¹²⁾。1) σ の値と、 $\Delta\mu$ の係数 κ_2, T_c, T 、及び初期値 Δn_0 を与える、2) 平衡条件(7)を解いて界面内密度分布 Δn を求める、3) 得られた Δn を用いて式(6)右辺の積分を計算する、4) κ_1 の値を σ ÷ (式(6)右辺積分値) によって決める。

図 1 に式(7)から求めた平坦な界面の厚さ形状 $\Delta n(x)$ の理論解を示す。界面は、図のように変数 Δn が連続的に遷移する領域に相当し、その幅は係数 κ_2 の値とともに増加する。後述する液滴シミュレーションでは、図 1 と同じ $T_c = 0.533, T = 0.5, n_0 = 1, \Delta n_0 = 0.42, \kappa_2 = 0.01$ を用いた結果、界面厚さは 2~3 格子点程度であった。 κ_2 の各値に対する表面張力 σ と $\Delta n = 0$ における Δn の勾配を表 1 に示す。温度等の値は図 1 と同じである。係数 κ_2 の値、すなわち界面厚さの増加とともに、 σ と勾配は減少する。なお、後述の計算結果では界面を $\Delta n = 0$ の等高面として描いた。

Fig. 1 Theoretical thickness profile of a flat interface.

Table 1 Surface tension and gradient of Δn for κ_2 .

κ_2	σ / κ_1	Max. $ \nabla \Delta n $
0.01	0.310	0.550
0.02	0.219	0.389
0.03	0.179	0.317
0.06	0.125	0.222

3. 格子ボルツマン法の二相流体モデル

格子ボルツマン法 (LBM) ^{(4), (5)} は連続体である流体をメソスケールの仮想的な粒子の集合体と仮定し、粒子が繰り返す衝突と並進を通して巨視的な流動現象を創発的に再現する統計力学的な CFD 手法である。LBM で近年開発されている一連の二相流体モデル^{(20)~(25)}は、上述の自由エネルギー理論に基づく自律的な相の分離と共存を、複雑な界面変形挙動を含めて模擬できる。本研究で使用する LB-BFM は、等温場における質量密度比 1 の二成分系二相流体を対象とする。なお、LB-BFM と同様の自由エネルギーの利用は PFM に基づく Navier-Stokes 方程式を用いた二相流直接数値解析法^{(8), (9)}にも見られる。

LB-BFM では、成分 A・B の粒子密度の和 n 、差 Δn 及び流速 $\mathbf{u}$ を、離散的粒子速度 $\mathbf{e}_a$ に対する分布関数 f_a 及び g_a を用いて次のように定義する。

$$n = \sum_a f_a = \sum_a f_a^{eq} \quad (9)$$

$$n\mathbf{u} = \sum_a f_a \mathbf{e}_a = \sum_a f_a^{eq} \mathbf{e}_a \quad (10)$$

$$\Delta n = \sum_a g_a = \sum_a g_a^{eq} \quad (11)$$

$$\Delta n\mathbf{u} = \sum_a g_a^{eq} \mathbf{e}_a \quad (12)$$

下付添字 a は粒子速度ベクトルの識別子、上付添字 eq は平衡状態を意味する。時刻 t にデカルト空間座標 $\mathbf{x}$ 上に分布する関数 f_a および g_a は、次の格子ボルツマン方程式 (Lattice Boltzmann Equation, LBE) ,

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{e}_a \cdot \nabla f_a = -\frac{1}{\tau_1} [f_a - f_a^{eq}(t, \mathbf{x})] \quad (13)$$

$$\frac{\partial g_a}{\partial t} + \mathbf{e}_a \cdot \nabla g_a = -\frac{1}{\tau_2} [g_a - g_a^{eq}(t, \mathbf{x})] \quad (14)$$

に従って時間発展する。式(14)の移流項では、界面での体積拡散を抑えて非混和性二相を再現できるように f_a を f_a^{eq} に置き換えている^{(17), (18)}。上二式右辺の BGK 近似の衝突項⁽²⁰⁾において、 τ_1 及び τ_2 は平衡緩和時間であり、巨視的輸送係数に關係する。また、平衡分布関数 f_a^{eq} 及び g_a^{eq} には、式(3)及び(5)が次式を通して組み込まれる⁽²⁵⁾。

$$P_{a\beta} = \sum_a f_a^{eq} (e_{a\alpha} - u_\alpha) (e_{a\beta} - u_\beta) \quad (15)$$

$$\Gamma \Delta \mu \delta_{a\beta} = \sum_a g_a^{eq} (e_{a\alpha} - u_\alpha) (e_{a\beta} - u_\beta) \quad (16)$$

ここで Γ は粒子の易動度 (Mobility) に関するパラメータであり、本研究では $\Gamma = 5$ とした。上述の LB-BFM が低 Mach 数で以下の二相流れ場の支配方程式を再現することは、Chapman-Enskog の方法もしくは S 展開によって証明できる^{(4), (5), (27), (28)}。

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n u_\beta}{\partial x_\beta} = 0 \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial n u_\alpha u_\beta}{\partial x_\beta} = & -\frac{\partial P_{a\beta}}{\partial x_\beta} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[\nu \left(\frac{\partial n u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial n u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial n u_\beta}{\partial x_\beta} \right) \end{aligned} \quad (18)$$

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} + \frac{\partial \Delta n u_\beta}{\partial x_\beta} = C \quad (19)$$

連続の式(17)と運動方程式(18)は式(13)より導出され、界面形状 Δn に関する移流項を持つ Cahn-Hilliard 方程式⁽⁹⁾(19)は式(14)から得られる。式(19)右辺の C は、化学ポテンシャル $\Delta \mu$ の勾配で生じる Δn の流束を含み、平衡状態では消える。

本研究では、数値安定性を高めることが容易な有限差分格子ボルツマン法⁽²⁹⁾に基づいて LBE(13), (14) を離散化した。時間・空間微分に対して 2 次精度 Runge-Kutta 及び 3 次精度風上差分スキームを適用した。物理空間は幅 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$ の立方格子で一様に離散化し、LBE の CFL 条件^{(23), (29)}から時間刻み Δt を 0.25 とした。粒子速度空間は、静止状態と速さ 2 及び $\sqrt{3}$ の 15 方向に離散化した (図 2)。この場合、式(18)の動粘性係数 ν は次式で与えられる^{(18), (25)}。

$$\nu = \frac{2}{3} \tau_1 \quad (20)$$

Fig.2 Particle velocity set.

Fig.3 Flow field schematic.

4. 液滴挙動の数値シミュレーション

以下、LB-BFM による 3 次元一様せん断流中液滴挙動の数値シミュレーションについて述べる。まず、単一液滴の変形と分裂に関する LB-BFM 予測の妥当性を検討するため、計算結果を微小変形理論解⁽³⁰⁾ 及び VOF 法による既存の数値解⁽³¹⁾と比較する。次に、液滴数密度と初期配置条件が液滴の変形・分裂及び液滴内部圧力に及ぼす影響を考察する。なお、今回の計算は、一部を除いて VOF 法と同じ液滴直径と空間解像度の条件で実施した。

4.1 計算対象 図3に計算対象を示す。文献(22)同様、液滴は z 方向に幅 H で設置した2枚の平行平板に挟まれ、 x , y 方向に関して長さ L_x 及び L_y の空間周期性を有している。平板は、一定の速さ U_w で互いに逆の水平方向に移動し、ひずみ速度 $\dot{\gamma} = 2U_w/H$ のせん断速度分布を形成させる。時刻 $t=0$ において、直径 $d_0=16$ の球形単一液滴 ($\Delta n < 0$ の流体領域) が、同じ質量密度と粘性の連続液相 ($\Delta n < 0$) 中に浮遊している。平板上の格子点には、分布関数 f_a と g_a に対して外挿法の境界条件⁽²²⁾を適用した。本計算は、次式で定義される Reynolds 数 Re と Capillary 数 Ca をパラメータとして実施した。

$$Re = \left(\frac{d_0}{2} \right)^2 \frac{\dot{\gamma}}{\nu} \quad (21)$$

$$Ca = \frac{d_0 \dot{\gamma} \nu}{2\sigma} \quad (22)$$

Fig.4 Measures of deformation and orientation of drop.

4.2 液滴の変形 まず、定常状態における液滴の変形度合いを定量的に評価するため^{(22), (30), (31)}、図4に示す Taylor Deformation Parameter D 及び Orientation Angle θ を用いて形状を測定した。図中の L と B は、楕円形液滴の長半径と短半径である。初期状態では、 $H=128$, $L_x=64$, $L_y=32$ の領域内の連続相は中央に配置された液滴とともに静止し、平板が突然移動し始めることにより、領域内に時間依存のせん断速度分布が形成される。

図5, 6に、パラメータ D 及び θ の計算結果を既存の数値解及び理論解とともに示す。Reynolds 数 Re は 0.0625 に固定し、Capillary 数 Ca のみを变化させ

Fig.5 Taylor deformation parameter of drop in steady state.

Fig.6 Orientation angle of deformed drop in steady state.

ている。LB-BFM による D の予測値は、 Ca 数とともに増加する点で理論解⁽³⁰⁾及び VOF 法による解⁽³¹⁾と一致している。一方、 θ の予測値は、VOF 法による数値解と良く一致しており、微小変形を仮定した理論解とは異なる結果が得られている。

LBM と VOF 法の D の値の差が Ca の増加とともに広がったのは、前者の液滴が後者のものより厚い界面を持つことと、変形度合の増加に関係なく界面を厚さ無しの $\Delta n = 0$ の等高面で一律に代表したこととに起因する。図1に示したように、 Δn の値は二相間の有限な空間内で連続的に変化するため、その何処を界面の代表値と仮定するかで L と B の値が界面厚さの範囲で異なってくる。ただし、4.3 で述べるように、LBM でも、 d_0 の増加により界面を相対的に薄くすれば、 $\Delta n = 0$ の等高面から求める D の値は VOF 法の予測に近づくと考えられる。一方、 θ の計算結果の良い一致は、長半径 L の方向が界面の代表位置に関係なく一定であるためであり、LBM が液滴に働くせん断応力と表面張力の釣り合いを VOF 法とほぼ同じ精度で再現することを意味する。

4.3 液滴の分裂 次に、前節と同じ直径の単一液滴の分裂に関するシミュレーションを $H=L_x=64$, $L_y=32$ の計算領域で実施した。液滴は初期に領域中央に浮遊しているが、連続相には一様せん断速度分布を与えた。図7に、 $Ca=0.3$ 及び $Re=0.1, 0.5, 0.6$ に対する $y=16$ の $x-z$ 断面における界面形状と流速分布を示す。尚、比較として、 $H=L_x=96$, $L_y=48$ の領域に $d_0=24$ の液滴を配置した場合の計算結果も示す。 Re の増加に伴い液滴はより大きく変形するが、分裂せずに定常状態に達した。一方、同じ Ca で $Re=0.75$ の条件(図8)では、楕円体からダンベル形状へと無次元時間 $t^*=100$ 程度をかけて徐々に変形した後、最終的に2つに分裂した。また、空間解像度が1.5倍の場合(図9)にも分裂が発生した。

Fig.7 Steady-state solutions of interfacial profile and flow velocity on a cross section in x-z plane through the center of the drop at $Ca=0.3$, and $d_D=16$ (in left column), 24 (in right column).

Fig.8 Snapshots of 3D drop with $d_D=16$ for $Ca=0.3$ and $Re=0.75$, at $t^*=t \times 2U_w/H$.

Fig.9 Snapshots of 3D drop with $d_D=24$ for $Ca=0.3$ and $Re=0.75$, at $t^*=t \times 2U_w/H$.

尚、図では見やすいように1格子点おきに速度ベクトルを描いている。上4条件に対するLB-BFMの結果では、表2に示すように、各 Re での D の値は $d_D=16$ の場合にはVOF法よりもやや小さく、 $d_D=24$ の場合にVOF法の予測に近づいたのは、直径が増加

Table 2 Taylor deformation parameter D in LBM simulation at $Ca=0.3$, compared with the VOF method prediction.⁽³¹⁾

D	Re				
	$d_D=16$	0.1	0.5	0.6	0.75
	LBM	0.347	0.429	0.459	break
D	$d_D=24$	0.353	0.456	0.481	break
	VOF	0.3869	0.45	0.4768	break

Fig.10 Time series of volume of drop with $d_D=16$ for $Ca=0.3$ and $Re=0.75$.

して界面領域が液滴本体に比べて相対的に薄くなったためと考えられる。しかし、 d_D の両方の値に対して、 Re 数増加に伴う D の増加と $Re=0.75$ での分裂に関してVOF法と一致する結果が得られた。

図10は、 $Ca=0.3$ 、 $Re=0.75$ で分裂した $d_D=16$ の液滴体積の時間変化を示す。ここでは、液滴体積を、変数 Δn が閾値 $\Delta n'$ 以下の値を持つ格子点の数 N で評価し、基準 N_0 を無次元時刻 $t^*=0.85$ での値とした。 $\Delta n'$ としては、界面領域内の Δn の連続的な変化を考慮し、 $\Delta n=0$ の他に、そこから連続相側($\Delta n>0$)の領

域)へ初期値 Δn_0 の10~80%移動した値も採用した。 $\Delta n^*=0, 0.1\Delta n_0, 0.5\Delta n_0$ の場合の液滴格子点数 N は、時間が進むにつれて次第に減少した後、 $t^*=65\sim 80$ 付近で増加に転じるが分裂後に再度減少した。この減少は、変形に伴う液滴表面積の増加によって液滴体積の一部が新たな界面領域に割り当てられるために生じている。しかし、 N は Δn^* の増加に従って一定に保たれる傾向にあり、 $\Delta n^*=0.7\Delta n_0$ および $0.8\Delta n_0$ に対する N の変動は $t^*=100$ 近傍の分裂前後を除き約 $\pm 3\%$ の範囲に留まっている。どの閾値の N も分裂時に増加するが、その後にはほぼ分裂前の値を回復した。以上の結果は、LB-BFMでは界面厚さを加味した液滴体積が楕円体変形中だけでなく分裂後も良く保存されることを示しており、今回設定した計算領域の空間解像度や d_b の値は適切であると考える。

Fig.11 Diagram of drop breakup in terms of the capillary and Reynolds numbers.

$d_b=16$ の各 Re と Ca において本シミュレーションで観察された液滴分裂の有無を図11に示す。図中の鎖線は、VOF法で得られた分裂臨界条件⁽⁶¹⁾である(鎖線上部で分裂発生)。本計算結果はVOF法による予測と良好に一致している。

以上より、LB-BFMは液滴の変形と分裂に関して既存の界面追跡モデルに基づく数値解析手法と同等の予測精度を有することを確認できた。

4.4 分裂に対する液滴配置の影響 続いて、変形と分裂に対する液滴の配置の影響を調べるため、液滴の初期配置が異なる4条件を対象として計算した。 Ca, Re の値は、前節の単一液滴に関する結果からは分裂が予測される条件、0.3, 1.0とした。計算領域と液滴径 $d_b=16$ は、前節のシミュレーションと同じであるが、液滴数密度が倍になるように x 軸方向の液滴間距離を半分に縮めた。図12に初期配置条件Case (A)及びCase (B)を示す。前者では、2つの液滴の体積中心が領域中央の同一 x 軸線上に位置する

Fig.12 Initial conditions of drop interaction simulations.

のに対し、後者では、同一 $x-z$ 平面内でかつ中間 $x-y$ 平面から $\pm d_b$ 離れた z 座標に液滴が置かれている。

無次元時間 $t^*=t \cdot 2U_W/H$ における圧力場と液滴形状のCase (A)の計算結果を図13に示す。本計算は、空間周期性を考慮して液滴1個を含む半分の領域で

Fig.13 Snapshot of steady-state pressure field on a cross-sectional $x-z$ plane and drop interface in Case (A).

実施した。なお、圧力は式(4)に密度勾配による界面エネルギーを加味した次式^{(21),(22)}で算出した。

$$\bar{P} = P + \kappa_l |\nabla \Delta n|^2 \quad (23)$$

圧力の等高線は、計算に用いた初期値 $P_0 = n_0 T = 0.5$ から0.51の値まで 2×10^{-3} 刻みで描かれている。Case (A)の液滴は分裂せずに楕円体形状に変形して定常状態に達した。一方、図14に示すCase (B)では、液滴は逆方向に移動しながら変形を続け、単一液滴の場合と同様に、界面がダンベル形状のスロート部分で破断することが無次元時間 $t^* \approx 35.55$ と 36.33 の間で確認された。さらに、Case (A)と(B)の液滴の y 軸方向の初期配置を変更したCase (C)および(D)の計算も実施した。図15に見られるように、2つの液滴が高さ $z=H/2$ の同一 $x-y$ 平面上に置かれるCase (C)の場合、Case (A)と同様に液滴の形状は楕円体に変化したまま定常に至るが、異なる高さの $x-y$ 平面に置かれたCase (D)の液滴はCase (B)同様分裂した。

このように、同じ Ca, Re 、および液滴数密度の条件でも液滴の挙動が違う原因を明らかにするため、 $x-y$ 平面に作用する x 方向のせん断応力 T_{zx} の空間分

Fig.14(1) Snapshots of pressure field and drop interface at $t^* = t \times 2U_w/H$ in Case (B).

Fig.15 Initial conditions and snapshots of drop interface at $t^* = t \times 2U_w/H$ in Case (C) and Case (D).

布を求めた。図 16 は、Case(A)~(D)各々のある時刻に楕円体形状の液滴端部の近傍に位置する y - z 断面内の T_{zx} の分布を示す。なお、 T_{zx} の数値は、移動平板が流れ場に与えるせん断応力で無次元化されている。どのケースでも、液滴の体積中心が位置する z 座標付近で T_{zx} が減少する領域が現れているが、Case(A)と(C)ではそれぞれ Case(B)と(D)よりも減少が大きい上にその領域も広い。この結果より、複数の液滴がせん断応力の作用する同じ高さの平面上に存在する場合、表面張力の影響がその平面付近に集中して局所的にせん断応力の効果を弱めるために変形が抑制されて分裂が発生しないと考えられる。

Fig.16 Snapshots of shear stress for $Ca=0.3$ and $Re=1$.

以上より、一様せん断流中における多数の液滴の変形・分裂は、せん断の強さ、粘性、表面張力、液滴の数密度（もしくは空間周期性）だけでなくそれらの初期位置にも依存すること、及び効率的な二相流体の微粒化を実現する上で分散流体粒子の空間的配置が重要な因子の一つであることがわかった。

4.5 液滴の変形と分裂による圧力変化 最後に、前節のシミュレーションで得た液滴の変形と分裂における圧力変化を検討する。図 13, 14 に示したように、液滴内部の圧力は Case (A)及び(B)ともに界面曲率が大きい両端部近傍で高い値となっている。さらに Case (B)では、局所的圧力上昇がダンベル形状のスロート部分（図 14 (e), (f), (g)）にも生じている。図 14(g)において、液滴は界面画像からは分裂していないようにみえるが、圧力分布から判断すると、スロート部の圧力のピーク形状は図(f)の直線状態から図(g)では2個のピークに分かれた状態になっており、分裂直後の液滴の尖頭部分（同図(h)）の形成準備が既になされているようにみうけられる。

図 17 に、Case (B)における液滴内部の無次元最大圧力の時間変化を示す。図中の指標(a)-(i)は、図 14

Fig.17 Time series of normalized maximum pressure increase inside drop in Case (B).

に示した各無次元時間 t^* での計算結果(a)-(i)に対応する。最大圧力は、液滴が楕円体形状をとる(a)から(d)までは時間とともに比較的緩やかに増加している。この変化は Laplace 則に従うものと考えられ、界面曲率が大きい液滴両端部で生じている。続いて、界面の形がダンベル状に移行する時刻 $t^* = 20$ の(d)から 30 の(e)までは、最大圧力はほぼ一定値を維持している。ここでは、図 14(d)と(e)を比較すると液滴端部では界面曲率にほとんど変化がみられないことから、圧力は液滴のスロート部でも上昇するものの、時刻(e)における最大値は依然両端部に位置することがわかる。(e)の後、圧力は急激に増加し、時刻(f)で最大値に達し、(g)で一度減少したのに続いて再び時刻(h)でピーク値をとって再度減少する。図 14 と照合すると、後半時刻の圧力変化は、界面破断の前後に発生しており、1 度目の圧力ピークはスロート部の破断直前に、2 度目のピークは液滴の尖頭部が急速に収縮する破断直後に位置することがわかる。

以上より、せん断による液滴の分裂は、非常に急激な内部圧力の時間変化と局所的変化をもたらすことを確認できた。尚、図 17 の破線内の図に示すように、時間刻み Δt を半分の 0.125 とした場合も、同様の最大圧力の時間変化の他に、微小な圧力振動が現れた。本計算の LBE(13), (14)の Courant 数は、粒子速度 $\mathbf{e}_a$ の最大値 2.0、空間格子幅 $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ 1.0、 $\Delta t = 0.125, 0.25$ に対して 0.25, 0.5 となり、数値安定性を確保するための CFL 条件、 $|\mathbf{e}_a| \Delta t / \Delta x \leq 1^{(29)}$ を満たす。また、その振動幅は初期圧力値 $P_0 = n_0 T = 0.5$ の 0.5%未満と非常に小さい。よって、図中の微小振動の発生原因は、数値不安定性ではなく、実効圧力を式(23)で求める際、非定常流れで界面曲率の時空間変化が激しい液滴領域での Δt の勾配を常に 4 次精度の中心差分で近似したことにあると考えられる。

5. 結 言

本研究では、閉鎖性の高い汚染水域の環境改善技術に有用な二相流体の微粒化機構の基礎的検討のため、せん断流中における液滴の変形と分裂の数値シミュレーションを実施した。計算に使用した格子ボルツマン法の Binary Fluid Model (LB-BFM) は、van-der-Waals-Cahn-Hilliard 自由エネルギー理論に従って統計熱力学的に二相流体界面を再現することができる。シミュレーションの実施に当たり、LB-BFM を改良し、非混和性二相を再現するとともに、表面張力と界面の厚さを柔軟に与えることができるようにした。また、界面エネルギーの定義に基づく表面張力の設定手順を提案した。本手法により移動平板間一様せん断流中に浮遊する液滴の数値シミュレーションを実施した結果、以下の知見を得た。

- (1) 単一液滴の変形および分裂挙動に関して、改良した LB-BFM は、既存の微小変形理論解及びVOF 法による数値解と良く一致する予測結果を与える。
- (2) 多数の液滴の変形と分裂は、せん断強さ、粘性、表面張力、液滴数密度だけでなく、それらの初期配置にも依存している。従って、せん断流中の液滴配置は、効率的二相流体の微粒化を実現する上で重要な因子の一つである。
- (3) 液滴内部の最大圧力は、楕円体への変形の際には、界面曲率が大きい液滴両端部において徐々に増加していくが、液滴が分裂する際にはダンベル形状のスロート部分において非常に大きな圧力増加が生じ、最大圧力の時間変化も大きくなる。

文 献

- (1) 大成博文, 資源処理技術, **46** (1999), 238-244.
- (2) 大成博文, 高橋正好, 氷室昭三, 赤対秀明, 混相流, **16-2** (2002), 130-137.
- (3) Fujiwara, A., Takagi, S., Watanabe, K., and Matsumoto, Y., Proc. 4th ASME-JSME Joint Fluids Eng. Conf., Paper No. FEDSM 2003-45162, Honolulu, Hawaii, USA, July 6-10, 2003.
- (4) Chen, S. and Doolen, G.D., Annu. Rev. Fluid Mech., **30** (1998), 329-364.
- (5) Succi, S., The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond (2001), Oxford at the Clarendon Press.
- (6) Swift, M. R., Orlandini, E., Osborn W. R., and Yeomans, J. M., Phys. Rev., **E 54** (1996), 5041-5052.
- (7) Gonnella, G., Orlandini, E. and Yeomans, J.M., Int. J. Modern Phys., **C 8** (1997), 783-792.
- (8) Jacqmin, D., J. Comput. Phys., **155** (1999), 96-127.
- (9) Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N. and Delhay, J.M., J. Comput. Phys., **169** (2001), 624-651.
- (10) Hirt, C.W. and Nichols, B.D., J. Comput. Phys., **39** (1981), 201-225.
- (11) 秋山守, 有富正憲, 「新しい気液二相流数値解析-多次元流動解析-」 (2002), 150-177, コロナ社
- (12) Brackbill, J.U., Kothe, D.B. and Zemach, C., J. Comput. Phys., **100** (1992), 335-354.
- (13) Ashgriz, N. and Poo, J.Y., J. Comput. Phys., **93** (1991), 449-468.
- (14) 功刀資彰, 機論 B, **63-609** (1997), 1567-1584.
- (15) Yabe, T., Ishikawa, T., Wang, P.Y., Aoki, T., Kadota, Y. and Ikeda, F., Comput. Phys. Commun., **66** (1991), 233-242.
- (16) Cahn, J.W. and Hilliard, J.E., J. Chem. Phys., **28** (1958), 258-267.
- (17) Takada, N., Tomiyama, A. and Hosokawa, S., Int. J. Modern Phys., **B 17** (2003), 179-182.
- (18) Takada, N., Tomiyama, A. and Hosokawa, S., Computational Fluid Dynamics J., **12** (2003), 475-481.
- (19) 小野周, 「表面張力」 (1980), 114-116, 共立出版.
- (20) Chen, Y., Teng, S. and Ohashi, H., Proc. 3rd Organized Multiphase Flow Forum '99, Yokohama, Japan, Dec. 2-3 (1999), 58-64.
- (21) 稲室隆二, 尾形雄司, 荻野文丸, 第 16 回数値流体力学シンポジウム講演論文集 (2002), 論文番号 PD12-1.
- (22) Inamuro, T., Tomita, R. and Ogino, F., Int. J. Modern Phys. B **17** (2003), 21-26.
- (23) 瀬田剛, 高橋亮一, 奥井健一, 竹越栄俊, 機論 B, **68-672** (2002), 2186-2194.
- (24) Seta, T., Kono, K., and Chen, S., Int. J. Modern Phys., **B 17** (2003), 169-172.
- (25) Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A. and Hosokawa, J. Nucl. Sci. Technol., **38** (2001), 330-341.
- (26) Bhatnagar, P.L., Gross, E.P. and Krook, M., Phys. Rev., **94** (1954), 511-525.
- (27) 曾根良夫, 青木一生, 「分子気体力学」 (1994), 朝倉書店.
- (28) Sone, Y., Rarefied Gas Dynamics, ed. by D.Dini, Editrice Tecnico Scientifica, Pisa (1971), 737-749.
- (29) Cao, N., Chen, S., Jin, S., and Martinez, D., Phys. Rev. E **55** (1997), 21-24.
- (30) Cox, R.G., J. Fluid Mech., **37** (1969), 601-623.
- (31) Li, J., Renardy, Y.Y., Renardy, M., Phys. Fluids, **12** (2000), 269-282.
- (32) Chen, S. and Martinez, D., Phys. Fluids, **8** (1996), 2527-2536.